

(19)日本特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11)特許出願公開番号

特開平6-251125

(43)公開日 平成6年(1994)9月8日

(51)Int.Cl. <sup>8</sup>	識別記号	序内整理番号	FI	技術表示箇所
G 0 6 F 15/62	3 5 0	8125-5L		
15/60	4 5 0	7623-5L		

審査請求 有 請求項の数 6 FD (全 10 頁)

(21)出願番号 特願平5-50592

(22)出願日 平成5年(1993)2月22日

(71)出願人 000004237

日本電気株式会社  
東京都港区芝五丁目7番1号

(71)出願人 000232092

日本電気ソフトウェア株式会社  
東京都港区高輪2丁目17番11号

(72)発明者 三浦 一成

東京都港区芝五丁目7番1号 日本電気株式会社内

(72)発明者 佐伯 康夫

東京都港区高輪一丁目17番11号 日本電気ソフトウェア株式会社内

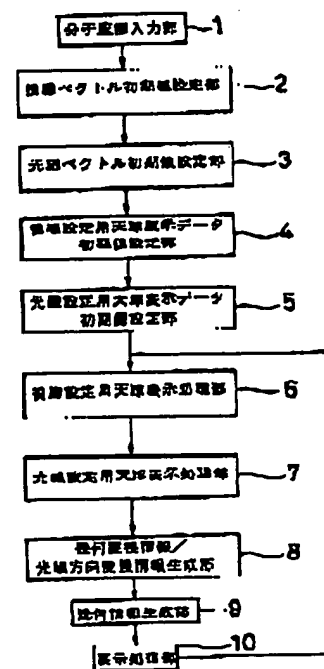
(74)代理人 弁理士 河原 純一

(54)【発明の名称】 3次元分子情報の表示における視線／光線方向変更装置

## (37)【要約】

【目的】 3次元分子情報について視線方向や平行光線の入射方向を変更する際に操作方法と操作結果とを容易に把握できるようにする。

【構成】 視線ベクトル初期値設定部2および光線ベクトル初期値設定部3は視線ベクトルおよび光線ベクトルの初期値を設定し、視線設定用天球表示データ初期値設定部4および光線設定用天球表示データ初期値設定部5は視線設定用天球および光線設定用天球の表示データの初期値を設定する。視線設定用天球表示処理部6は視線設定用天球を分子骨格に重ねて表示し視線方向の変更を対話的に行い、光線設定用天球表示処理部7は光線設定用天球を分子骨格に重ねて表示し平行光線の入射方向の変更を対話的に行う。幾何変換情報／光線方向変換情報生成部8は、視線ベクトルおよび光線ベクトルの変更情報をもとに視線設定用天球および分子骨格の回転情報ならびに光線方向変換情報を生成する。



(2)

特開平6-251125

## 【特許請求の範囲】

【請求項1】 分子骨格とそれに対応する分子軌道計算などから得られる物理量を含む3次元分子情報をグラフィックディスプレイ上に3次元的に表示する装置において、視点と注視点との位置情報を表現するワイヤフレームモデルの球でなる視線設定用天球を3次元分子情報を表示するグラフィックディスプレイ上に重ねて表示し視線方向の変更を対話的に行う視線設定用天球表示処理部を有することを特徴とする3次元分子情報の表示における視線方向変更装置。

【請求項2】 前記視線設定用天球表示処理部が、視線方向の変更を行う際に前記視線設定用天球上の視点の位置を表現するポイントの形状をグラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間における3次元的な位置を把握しやすいように変化させる請求項1記載の3次元分子情報の表示における視線方向変更装置。

【請求項3】 分子骨格とそれに対応する分子軌道計算などから得られる物理量を含む3次元分子情報をグラフィックディスプレイ上に3次元的に表示する装置において、

平行光線の入射方向を表現するワイヤフレームモデルの球でなる光線設定用天球を3次元分子情報を表示するグラフィックディスプレイ上に重ねて表示し平行光線の入射方向の変更を対話的に行う光線設定用天球表示処理部を有することを特徴とする3次元分子情報の表示における光線方向変更装置。

【請求項4】 前記光線設定用天球表示処理部が、平行光線の入射方向の変更を行う際に前記光線設定用天球上の平行光線の入射方向を表現するポイントの形状をグラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間における3次元的な位置を把握しやすいように変化させる請求項3記載の3次元分子情報の表示における光線方向変更装置。

【請求項5】 分子骨格とそれに対応する分子軌道計算などから得られる物理量を含む3次元分子情報をグラフィックディスプレイ上に3次元的に表示する装置において、

視点と注視点との位置情報を表現するワイヤフレームモデルの球でなる視線設定用天球を3次元分子情報を表示するグラフィックディスプレイ上に重ねて表示し視線方向の変更を対話的に行う視線設定用天球表示処理部と、

平行光線の入射方向を表現するワイヤフレームモデルの球でなる光線設定用天球を3次元分子情報を表示するグラフィックディスプレイ上に重ねて表示し平行光線の入射方向の変更を対話的に行う光線設定用天球表示処理部とを有することを特徴とする3次元分子情報の表示における視線/光線方向変更装置。

【請求項6】 前記視線設定用天球表示処理部が視線方

向の変更を行う際に前記視線設定用天球上の視点の位置を表現するポイントの形状をグラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間における3次元的な位置を把握しやすいように変化させ、前記光線設定用天球表示処理部が平行光線の入射方向の変更を行う際に前記光線設定用天球上の平行光線の入射方向を表現するポイントの形状をグラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間における3次元的な位置を把握しやすいように変化させる請求項5記載の3次元分子情報の表示における視線/光線方向変更装置。

## 【発明の詳細な説明】

## 【0001】

【産業上の利用分野】 本発明は3次元分子情報の表示における視線/光線方向変更装置に関し、特に分子骨格とそれに対応する分子軌道計算などから得られる物理量を含む3次元分子情報をグラフィックディスプレイ上に3次元的に表示し分析する場合に視線方向および平行光線の入射方向の変更をより容易に行う3次元分子情報の表示における視線/光線方向変更装置に関する。

## 【0002】

【従来の技術】 分子の性質や反応性を理解する上で、分子軌道計算や分子動力学計算の解析結果は非常に有用であることがわかっている。これらの解析結果は、膨大な数値情報として得られる。したがって、この膨大な数値情報を3次元分子情報として視覚化する技術が重要な役割を担っている（例えば、特開昭61-233872号公報、特開昭64-84392号公報等参照）。この視覚化された3次元分子情報をもとに、分子の3次元構造にもとづく物理的な性質を把握することができる。この3次元分子情報は、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間上に表示される。

【0003】 グラフィックディスプレイ上で3次元分子情報を効率的に解析するためには、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間に関連した視線方向や平行光線の入射方向の変更を容易に行うことができないと。また、これらの操作は、その操作方法と操作結果とを容易に把握することができるものでなければならない。

【0004】 現状では、グラフィックディスプレイ上に表示された3次元分子情報の視線方向や平行光線の入射方向の変更はグラフィックディスプレイ上に表示したダイヤルやスライダなどを利用し、これらにグラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間に関連した回転情報や移動情報を対応させる場合が多い。この方法では、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間の把握が難しく、感覚的な操作を強制する場合が多い。

【0005】 また、マウスを用いて視線方向や平行光線の入射方向の変更を行う場合もあるが、2次元平面であるグラフィックディスプレイ上で3次元的な操作を行うために感覚的な操作を伴うことが多い。

(3)

特開平6-251125

## 【0006】

【発明が解決しようとする課題】上述した従来の3次元分子情報の表示における視線／光線方向変更方法では、グラフィックディスプレイ上に表示された3次元分子情報の視線方向や平行光線の入射方向の変更を行う場合に、常にグラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間を想像しなければならないが、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間での回転情報や移動情報を直接操作して視線方向や平行光線の入射方向の変更を行い、その操作結果を想像することは困難であるという問題点がある。また、2次元平面であるグラフィックディスプレイ上で3次元的な操作を行う場合も、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間を想像する必要があるために、同じ問題点がある。

【0007】本発明の目的は、上述の点に鑑み、グラフィックディスプレイ上に表示された3次元分子情報について視線方向を変更する場合に、視点と注視点との位置情報を表現するワイヤフレームモデルの球を用いて視線方向の変更の操作方法と操作結果とを容易に把握できるようにした3次元分子情報の表示における視線方向変更装置を提供することにある。

【0008】また、本発明の他の目的は、グラフィックディスプレイ上に表示された3次元分子情報について平行光線の入射方向を変更する場合に、平行光線の入射方向を表現するワイヤフレームモデルの球を用いて平行光線の入射方向の変更の操作方法と操作結果とを容易に把握できるようにした3次元分子情報の表示における光線方向変更装置を提供することにある。

【0009】さらに、本発明の別の目的は、グラフィックディスプレイ上に表示された3次元分子情報について視線方向や平行光線の入射方向を変更する場合にその操作方法と操作結果とを容易に把握することができるようにした3次元分子情報の表示における視線／光線方向変更装置を提供することにある。

## 【0010】

【課題を解決するための手段】本発明の3次元分子情報の表示における視線方向変更装置は、分子骨格とそれに対応する分子軌道計算などから得られる物理量を含む3次元分子情報をグラフィックディスプレイ上に3次元的に表示する装置において、視点と注視点との位置情報を表現するワイヤフレームモデルの球でなる視線設定用天球を3次元分子情報を表示するグラフィックディスプレイ上に重ねて表示し視線方向の変更を対話的に行う視線設定用天球表示処理部を有する。

【0011】また、本発明の3次元分子情報の表示における光線方向変更装置は、分子骨格とそれに対応する分子軌道計算などから得られる物理量を含む3次元分子情報をグラフィックディスプレイ上に3次元的に表示する装置において、平行光線の入射方向を表現するワイヤフレームモデルの球でなる光線設定用天球を3次元分子

情報を表示するグラフィックディスプレイ上に重ねて表示し平行光線の入射方向の変更を対話的に行う光線設定用天球表示処理部を有する。

【0012】さらに、本発明の3次元分子情報の表示における視線／光線方向変更装置は、分子骨格とそれに対応する分子軌道計算などから得られる物理量を含む3次元分子情報をグラフィックディスプレイ上に3次元的に表示する装置において、視点と注視点との位置情報を表現するワイヤフレームモデルの球でなる視線設定用天球を3次元分子情報を表示するグラフィックディスプレイ上に重ねて表示し視線方向の変更を対話的に行う視線設定用天球表示処理部と、平行光線の入射方向を表現するワイヤフレームモデルの球でなる光線設定用天球を3次元分子情報を表示するグラフィックディスプレイ上に重ねて表示し平行光線の入射方向の変更を対話的に行う光線設定用天球表示処理部とを有する。

## 【0013】

【実施例】次に、本発明について図面を参照して詳細に説明する。

【0014】図1は、本発明の一次実施例に係る3次元分子情報の表示における視線／光線方向変更装置の構成を示すブロック図である。本実施例の3次元分子情報の表示における視線／光線方向変更装置は、分子座標入力部1と、視線ベクトル初期値設定部2と、光線ベクトル初期値設定部3と、視線設定用天球表示情報初期値設定部4と、光線設定用天球表示情報初期値設定部5と、視線設定用天球表示処理部6と、光線設定用天球表示処理部7と、幾何変換情報／光線方向変換情報生成部8と、幾何情報生成部9と、表示処理部10とから、その主要部が構成されている。

【0015】図2を参照すると、視線設定用天球表示処理部6の処理は、視線設定用天球表示スイッチ判定ステップ21と、視線設定用天球表示消去処理ステップ22と、視線設定用天球表示ポイント有無判定ステップ24と、ポイント表示処理ステップ25と、視線ベクトル変更情報取得処理ステップ26と、視線設定用天球平行移動判定ステップ27と、前回視線設定用天球表示消去処理ステップ28と、視線設定用天球表示情報変更処理ステップ29とからなる。

【0016】図3を参照すると、光線設定用天球表示処理部7の処理は、光線設定用天球表示スイッチ判定ステップ31と、光線設定用天球表示消去処理ステップ32と、光線設定用天球表示情報取得処理ステップ33と、光線設定用天球表示ポイント有無判定ステップ34と、ポイント表示処理ステップ35と、光線ベクトル変更情報取得処理ステップ36と、光線設定用天球平行移動判定ステップ37と、前回光線設定用天球表示消去処理ステップ38と、光線設定用天球表示情報変更処理ステップ39とからなる。

【0017】図4(a)は、3次元分子情報を表示する

(4)

特開平6-251125

グラフィックディスプレイ上に重ねて表示する視線方向および平行光線の入射方向の情報を表現するワイヤームードモデルの球を示す。以下、この2つの球を視線設定用天球S1および光線設定用天球S2と呼ぶ。なお、視線とは、視点（物体を見る位置）と注視点（物体の見つめる位置）とを結ぶ線のことである。視線設定用天球S1の中心は、注視点を表現する。視線方向の変更を行う前であれば、視線は画面に垂直で、その方向は画面の反対側に向かう方向である。視線方向は、いつでも最終的にこの状態になる。

【0018】平行光線の入射方向は、図4(e)に示すように、光線設定用天球S2上の十字状のポインタP2から光線設定用天球S2の中心に向かう方向で表現する。初めに分子骨格Mを表示した時点では、視線設定用天球S1および光線設定用天球S2の中心は一致し、分子の重心として設定される。視線の方向と平行光線の入射方向の初期値は、与えられた分子骨格Mがグラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間を占める範囲をもとに設定される。

【0019】また、視線設定用天球S1上で十字状のポインタP1を表示する場合は、図4(a)および図4

(b)に示すように、視線設定用天球S1上のポインタP1の位置によってポインタP1の形状を変化させ、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間における3次元的な位置を表現する。

【0020】視線方向を変更する場合には、2つの方法をとる。1つの方法は視点を変更する方法で、図4

(b)の【移動前】に示すように、対象とする分子骨格Mの見たい位置を視線設定用天球S1上のポインタP1に指定する。これにより、視線方向は視線設定用天球S1上のポインタP1から中心に向かう方向に変更される。この後、図4(b)の【移動後】に示すように、視線方向が画面に垂直になるまで、注視点を表現する視線設定用天球S1の中心を中心として分子骨格Mと視線設定用天球S1とが回転する。もう1つの方法は注視点を移動する方法で、図4(c)の【移動前】に示すように、視線設定用天球S1の中心を移動して行う。視線設定用天球S1の中心を移動した後は、図4(c)の【移動後】に示すように、視線設定用天球S1の中心が画面の中心にくるまで分子骨格Mおよび視線設定用天球S1が移動する。この他に、視線設定用天球S1の半径を変化させることにより、分子骨格Mの拡大および縮小を行う。

【0021】平行光線の入射方向を変更する場合にも、2つの方法がとられる。1つの方法は光線設定用天球S2上のポインタP2の位置を変更する方法で、もう1つの方法は光線設定用天球S2の中心を移動する方法である。視線設定用天球S1の場合と異なる点は、光線設定用天球S2の上下の極の位置が表示する画面の上下に固定されている点である。これは、3次元分子情報を投影

するスクリーンと平行光線の入射方向との位置関係がいつも固定されていることを表現している。これにより、グラフィックディスプレイ上に表示した分子骨格Mの注目したい部分（注視点）に対応した平行光線を自動的に当てることが可能となる。

【0022】次に、このように構成された本実施例の3次元分子情報の表示における視線／光線方向変更装置の動作について説明する。

【0023】分子座標入力部1は、分子軌道計算あるいは分子動力学計算の計算結果から分子骨格Mを表示するのに必要となる分子座標情報を取得する処理を行う。

【0024】視線ベクトル初期値設定部2は、最初にグラフィックディスプレイ上に表示するために利用する視線ベクトル（視線方向を定める有向ベクトル）の初期値を設定する。視線ベクトルの初期値は、注視点を分子の重心とし、視点の位置を分子骨格Mがグラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間を占める範囲から見やすい位置となるように算出し設定する。

【0025】光線ベクトル初期値設定部3は、光線ベクトル（平行光線の入射方向を定める有向ベクトル）の初期値を設定する。光線ベクトルの初期値は、視線ベクトル初期値設定部2で設定した視線ベクトルの初期値に対して所定の角度となるように算出し設定する。

【0026】視線設定用天球表示情報初期値設定部4は、グラフィックディスプレイ上に表示する視線設定用天球S1の初期値を設定する。視線設定用天球S1は、グラフィックディスプレイ上に表示する分子座標情報と同じ次元数のデータを持ち、3次元空間上の球として扱う。視線設定用天球S1について設定する初期値は、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間での視線設定用天球S1の中心座標とその半径である。視線設定用天球S1の中心座標の初期値は、分子の重心として設定し、半径は分子骨格Mがグラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間を占める範囲をもとに設定する。

【0027】光線設定用天球表示情報初期値設定部5は、光線設定用天球S2の初期値を設定する。光線設定用天球S2は、データの観点からは2次元の情報を持ち、3次元空間上の位置的には分子骨格Mを投影するスクリーン上に位置する。光線設定用天球S2の半径は、分子骨格Mを投影するスクリーンに視線設定用天球S1を投影したときの円の半径より大きくなるように設定する。また、光線設定用天球S2の中心は、分子骨格Mを投影するスクリーンに投影した視線設定用天球S1の中心（分子の重心に対応）と一致するように初期値を設定する。光線設定用天球S2の場合は、平行光線の入射方向を示す光線設定用天球S2上のポインタP2の位置の初期値も設定する。これは、光線ベクトル初期値設定部3で初期値を設定した光線ベクトルから算出する。

【0028】視線設定用天球表示処理部6は、視線設定

(5)

特開平6-251125

用天球表示スイッチのon, offを判定する(ステップ21)。なお、視線設定用天球表示スイッチは、視線設定用天球S1を利用した視線方向の変更を行う場合にonにするスイッチで、初期値はoffである。

【0028】視線設定用天球表示スイッチがoffの場合には、視線設定用天球表示処理部6は、グラフィックディスプレイ上に表示されている視線設定用天球S1の消去処理を行う(ステップ22)。グラフィックディスプレイ上に視線設定用天球S1が表示されていない場合は、何もしないで処理を終了する。

【0030】視線設定用天球表示スイッチがonの場合には、視線設定用天球表示処理部6は、視線設定用天球S1上にポイントP1があるかどうかを判断し(ステップ24)、視線方向の変更を行う場合には視線設定用天球S1上にマウスカーソルが位置されるので、その位置に対応するポイントP1の表示処理を行う(ステップ25)。視線設定用天球S1上のポイントP1の形状は、図4(a)および図4(b)に示すように、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間の3次元的な位置を把握しやすいように変化させる。

【0031】ポイントP1の形状は、図5(a)に示す3つの変数 $dx$ 、 $dy$ および $d\phi$ を変化させることにより行う。図5(a)中の2Aは、ポイントP1を形成する2つの線分の長さである。

【0032】変数 $dx$ 、 $dy$ および $d\phi$ を定めるために画面上のポイントの位置に対応する視線設定用天球S1上の座標での法線ベクトルが $\beta$ で与えられると仮定する。図5(b)に示すように、この法線ベクトル $\beta$ が分子骨格Mを投影するスクリーンの法線ベクトル $\alpha$ となす角度を $\theta$ とする。また、法線ベクトル $\beta$ をスクリーンに射影したときのベクトルを $\beta'$ とする。このとき、スクリーンのX軸とベクトル $\beta'$ となす角度を $\phi$ とする。スクリーン上で定義されるX軸の方向は、画面上での水平方向に対応し、Y軸は垂直方向に対応する。

【0033】変数 $\theta$ および $\phi$ を用いて変数 $dx$ 、 $dy$ および $d\phi$ を、次式のように定める。ただし、 $\Lambda$ は、ポイントP1を形成する2つの線分の半分の長さである。

$$\begin{aligned} dx &= A \cdot \sin \theta \cdot \cos \phi \\ dy &= A \cdot \sin \theta \cdot \sin \phi \\ 0^\circ < \phi \leq 45^\circ &\rightarrow d\phi = \phi \\ 45^\circ < \phi \leq 135^\circ &\rightarrow d\phi = 90^\circ - \phi \\ 135^\circ < \phi \leq 225^\circ &\rightarrow d\phi = \phi - 180^\circ \\ 225^\circ < \phi \leq 315^\circ &\rightarrow d\phi = 270^\circ - \phi \\ 315^\circ < \phi \leq 360^\circ &\rightarrow d\phi = \phi - 360^\circ \end{aligned}$$

【0035】ポイントP1の變形例を、図5(c)に例示する。

【0036】続いて、視線設定用天球表示処理部6は、視線設定用天球S1上にマウスカーソルを合わせ、マウスのボタンを押すなどの操作を行った場合に、視線ベクトルの変更が行われたことを認識する処理を行う(ステップ28)。

変更が行われた場合には、その変更情報を取得し、次の処理に移る。変更が行われなかった場合には、何もしないで次の処理に移る。

【0037】次に、視線設定用天球表示処理部6は、注視点の移動に対応する視線設定用天球S1の中心の平行移動が行われたかどうかを判断し(ステップ27)、移動が行われた場合には、視線設定用天球S1を分子骨格Mに対して平行移動するためにグラフィックディスプレイ上に前回表示した視線設定用天球S1の消去処理を行う(ステップ28)。画面に視線設定用天球S1が表示されていなければ、何もしないで次の処理に移る。移動が行われなかった場合には、何もしないで処理を終了する。

【0038】続いて、視線設定用天球表示処理部6は、視線設定用天球S1の平行移動が行われた場合には、視線ベクトルの変更情報が反映された視線設定用天球S1の表示情報を生成する処理を行う(ステップ29)。生成する表示情報は、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間上での視線設定用天球S1の中心の座標とその半径の値である。

【0039】次に、光線設定用天球表示処理部7は、光線設定用天球表示スイッチのon, offを判定する(ステップ31)。なお、光線設定用天球表示スイッチは、光線設定用天球S2を利用した平行光線の入射方向の変更を行う場合にonにするスイッチで、初期値はoffである。

【0040】光線設定用天球表示スイッチがoffの場合に、光線設定用天球表示処理部7は、グラフィックディスプレイ上に表示されている光線設定用天球S2の消去処理を行う(ステップ32)。グラフィックディスプレイ上に光線設定用天球S2が表示されていない場合は、何もしないで処理を終了する。

【0041】光線設定用天球表示スイッチがonの場合には、光線設定用天球表示処理部7は、この処理を通過した時点での平行光線情報から平行光線の入射方向を必ず光線設定用天球S2上のポイントP2の位置と光線設定用天球S2の中心位置とを計算する(ステップ33)。初めてこの処理を通過する場合は、光線設定用天球表示情報初期値設定部5で設定された光線設定用天球S2の表示情報の初期値が設定される。その他の場合は、幾何変換情報/光線方向変換情報生成処理部8で設定された平行光線情報から平行光線の入射方向を示す光線設定用天球S2上のポイントP2の位置と光線設定用天球S2の中心位置とを計算する。

【0042】次に、光線設定用天球表示処理部7は、光線設定用天球S2上にポイントP2があるかどうかを判断し(ステップ34)、平行光線の入射方向の変更を行う場合には光線設定用天球S2上にマウスカーソルが位置されるので、その位置に対応するポイントP2の表示処理を行う(ステップ35)。光線設定用天球S2上の

(6)

特開平6-251125

ポインタP2の形状は、図4(a)および図4(b)に示すように、視線設定用天球S1上のポインタP1の形状と同様に、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間の3次元的位置を把握しやすいように変化させる。

【0043】続いて、光線設定用天球表示処理部7は、光線設定用天球S2上にマウスカーソルを合わせてマウスのボタンを押すなどの操作を行った場合に、光線ベクトルの変更が行われたことを認識する処理を行う(ステップ36)。変更が行われた場合には、その変更情報を取得し、次の処理に移る。変更が行われなかった場合には、何もしないで処理を終了する。

【0044】次に、光線設定用天球表示処理部7は、光線設定用天球S2の中心の平行移動が行われたかどうかを判断し(ステップ37)、移動が行われた場合には光線設定用天球S2を分子骨格Mに対して平行移動するため、グラフィックディスプレイ上に前回表示した光線設定用天球S2の消去処理を行う(ステップ38)。而して光線設定用天球S2が動かされていない場合は、何もしないで次の処理に移る。移動が行われなかった場合には、何もしないで処理を終了する。

【0045】続いて、光線設定用天球表示処理部7は、光線設定用天球S2の平行移動が行われた場合には、光線ベクトルの変更情報が反映された光線設定用天球S2の表示情報を生成する処理を行う(ステップ39)。生成する表示情報は、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間上での光線設定用天球S2の中心の座標とその半径の値である。

【0046】幾何変換情報/光線方向変換情報生成部8は、視線ベクトルの変更情報をもとに視線設定用天球S1と分子骨格Mとを視線ベクトルが画面に垂直になるように回転するための回転情報を生成する。また、幾何変換情報/光線方向変換情報生成部8は、光線ベクトルの変更情報をもとに平行光線の入射方向を変更するための変換情報を生成する。視線ベクトルの変更のみが行われた場合でも、この視線ベクトルに対して適当な角度を持つ光線ベクトルを設定するための光線ベクトルの変換情報を生成する。

【0047】幾何情報生成部9は、分子座標情報、視線設定用天球表示情報、回転操作情報および平行光線情報をもとに分子骨格Mと視線設定用天球S1との表示に必要な幾何情報を生成する。また、幾何情報生成部9は、光線設定用天球表示情報をもとに光線設定用天球S2の表示と平行光線の入射方向を示すポインタP2の表示に必要な幾何情報を生成する。

【0048】表示処理部10は、幾何情報に基づいてグラフィックディスプレイに表示する処理を行う。幾何情報に基づき表示処理後、表示処理部10は、視線設定用天球表示処理部6に制御を戻し、視線設定用天球表示処理部6、光線設定用天球表示処理部7、幾何変換情報/

光線方向変換情報生成部8、幾何情報生成部9および表示処理部10の処理を繰り返させる。

【0049】

【発明の効果】以上説明したように本発明は、グラフィックディスプレイ上に表示された3次元分子情報について視線方向を変更する場合に、視点と注視点との位置情報を表現するワイヤフレームモデルの球となる視線設定用天球を表示するようにしたことにより、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間の把握が容易になり、視線方向の変更の操作方法と操作結果とを容易に把握することが可能となるという効果がある。

【0050】また、本発明は、グラフィックディスプレイ上に表示された3次元分子情報について平行光線の入射方向を変更する場合に、平行光線の入射方向を表現するワイヤフレームモデルの球となる光線設定用天球を表示するようにしたことにより、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間の把握が容易になり、平行光線の入射方向の変更の操作方法と操作結果とを容易に把握することが可能となるという効果がある。

【0061】さらに、本発明は、グラフィックディスプレイ上に表示された3次元分子情報について視線方向を変更する場合に、視点と注視点との位置情報を表現するワイヤフレームモデルの球となる視線設定用天球および平行光線の入射方向を表現するワイヤフレームモデルの球となる光線設定用天球を表示するようにしたことにより、グラフィックディスプレイ上の仮想的な3次元空間の把握が容易になり、視線方向および平行光線の入射方向の変更の操作方法と操作結果とを容易に把握することが可能となるという効果がある。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の一実施例に係る3次元分子情報の表示における視線/光線方向変更装置の構成を示すブロック図である。

【図2】図1中の視線設定用天球表示処理部の処理を示す流れ図である。

【図3】図1中の光線設定用天球表示処理部の処理を示す流れ図である。

【図4】(a)は視線方向および平行光線の入射方向の変更を行う場合に用いる視点設定用天球および光線設定用天球の表示例を示す図、(b)は視線方向の変更を行った場合の視点設定用天球と分子骨格との回転過程を例示する図、(c)は注視点の移動を行った場合の視線設定用天球と分子骨格との移動過程を例示する図である。

【図5】(e)はポインタの変形に使用する変数を説明する図、(f)はポインタの変形に使用するベクトルを説明する図、(g)はポインタの変形例を示す図である。

【符号の説明】

- 1 分子座標入力部
- 2 視線ベクトル初期値設定部

(7)

特開平6-251125

- 3 視線ベクトル初期値設定部
- 4 視線設定用天球表示情報初期値設定部
- 5 光源設定用天球表示情報初期値設定部
- 6 視線設定用天球表示処理部
- 7 光源設定用天球表示処理部
- 8 幾何変換情報/光線方向変換情報生成部
- 9 幾何情報生成部
- 10 表示処理部
- 21 視線設定用天球表示スイッチ判定ステップ
- 22 視線設定用天球表示消去処理ステップ
- 24 視線設定用天球上ポイント有無判定ステップ
- 25 ポイント表示処理ステップ
- 26 視線ベクトル変更情報取得処理ステップ
- 27 視線設定用天球平行移動判定ステップ
- 28 前回視線設定用天球表示消去処理ステップ

- 29 視線設定用天球表示情報変更処理ステップ
- 31 視線設定用天球表示スイッチ判定ステップ
- 32 視線設定用天球表示消去処理ステップ
- 33 視線設定用天球表示情報取得処理ステップ
- 34 視線設定用天球上ポイント有無判定ステップ
- 35 ポイント表示処理ステップ
- 36 視線ベクトル変更情報取得処理ステップ
- 37 視線設定用天球平行移動判定ステップ
- 38 前回視線設定用天球表示消去処理ステップ
- 39 視線設定用天球表示情報変更処理ステップ

M 分子骨格

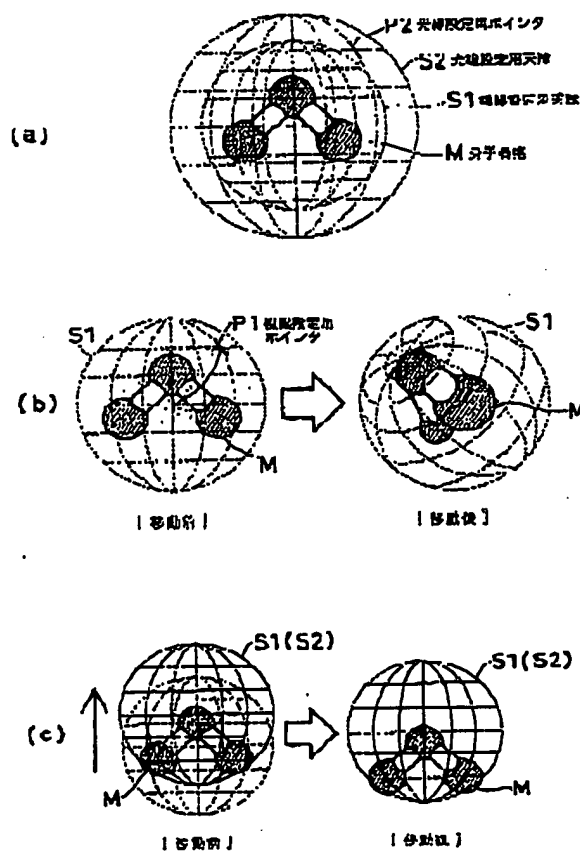
P1 視線設定用ポイント

P2 光源設定用ポイント

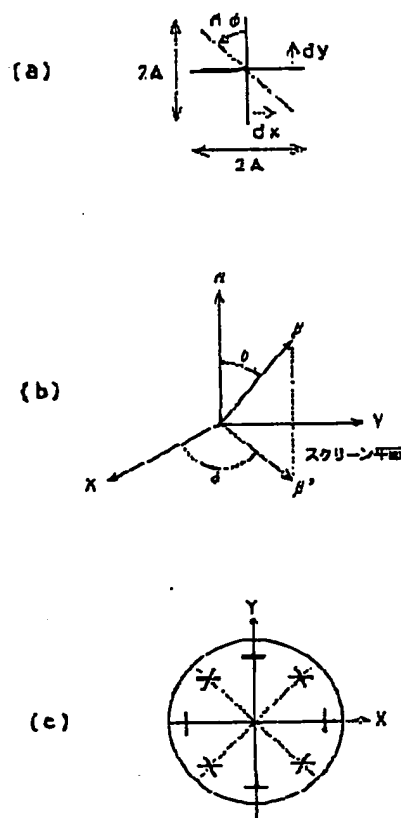
S1 視線設定用天球

S2 光源設定用天球

【図4】



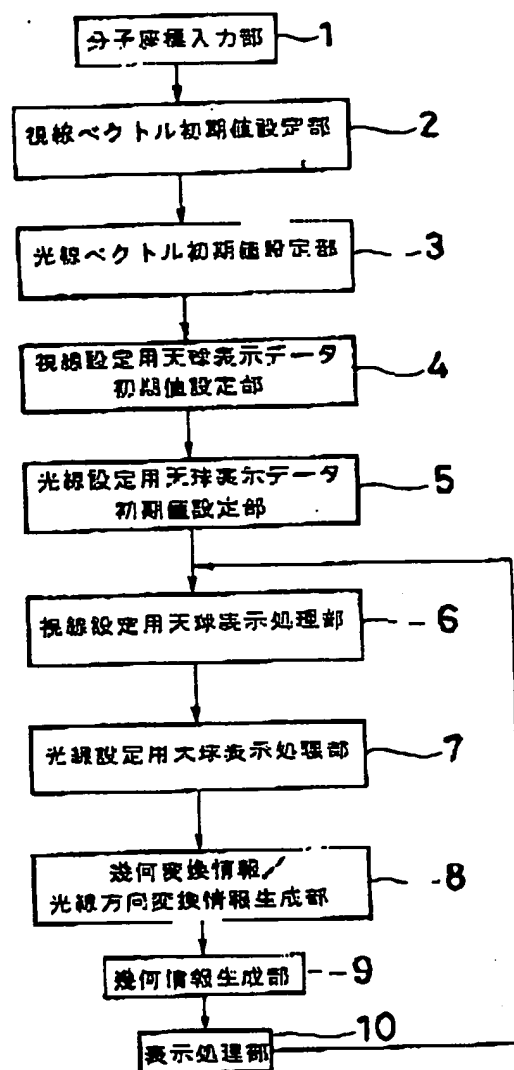
【図5】



(8)

特開平6-251125

【図1】



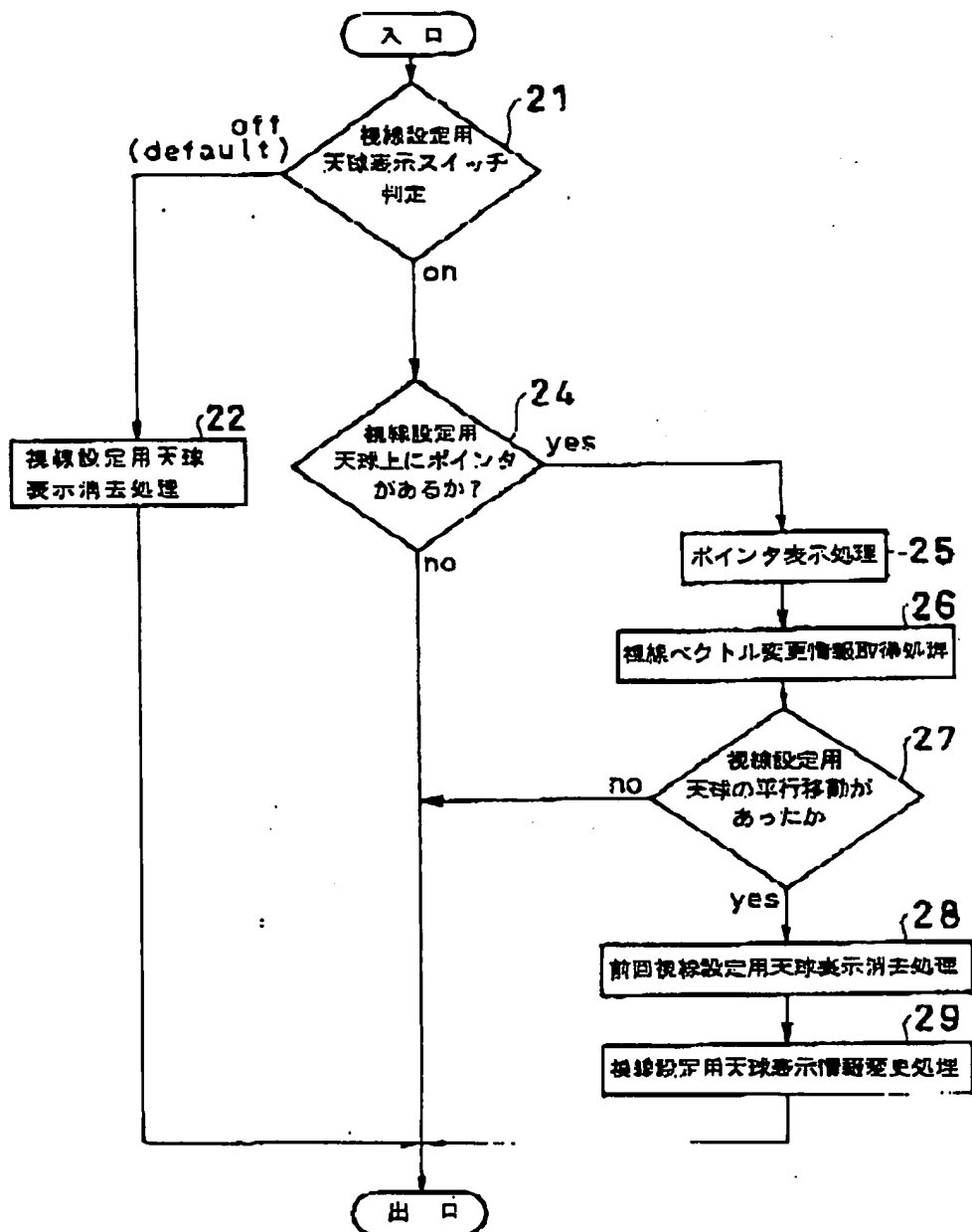


(D)

特開平6-251125

【図2】

視線設定用天球表示処理部6

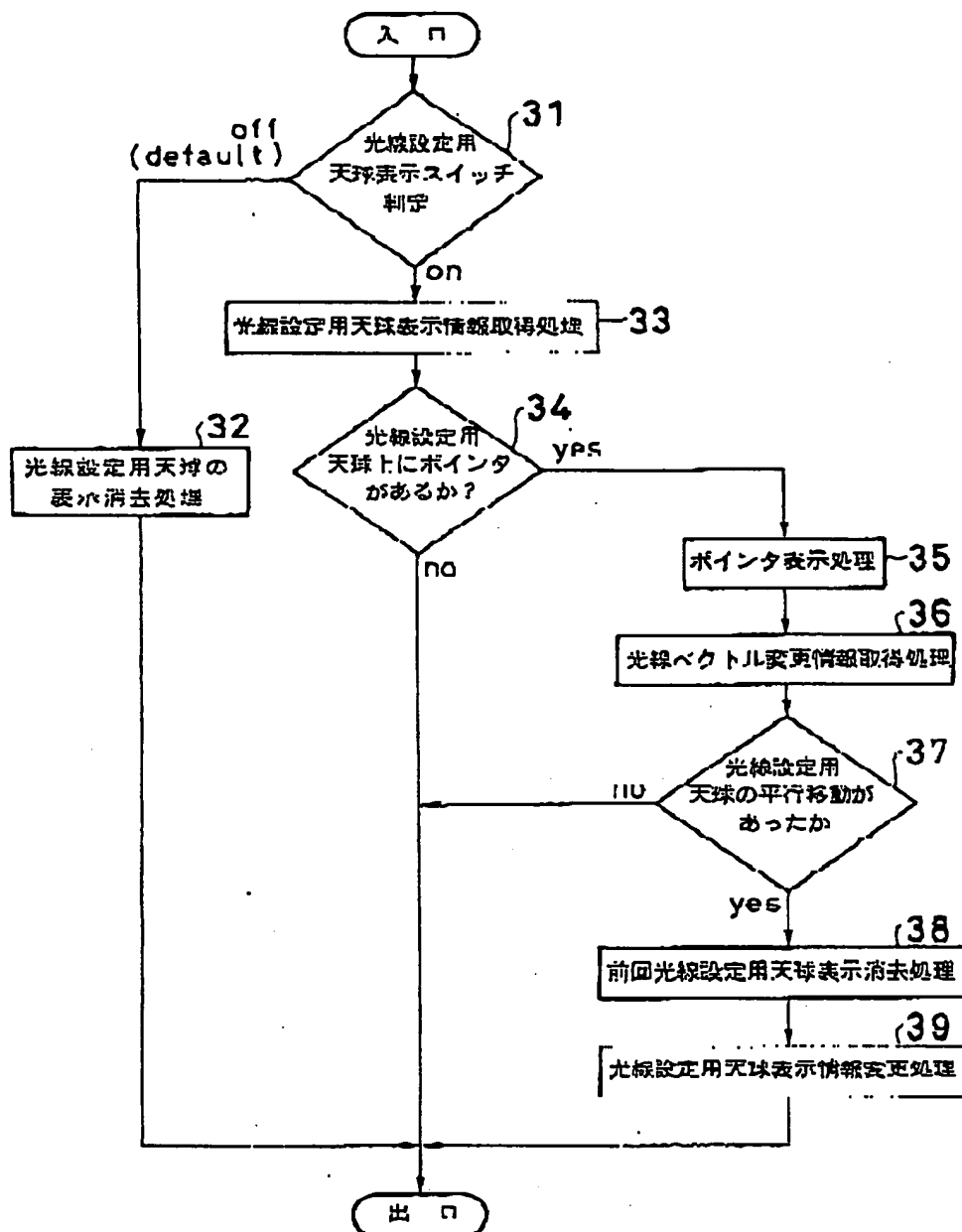


(10)

特開平6 251125

【図3】

光線設定用天球表示処理部7



## LINE-OF-SIGHT/LIGHT BEAM DIRECTION CHANGING DEVICE IN DISPLAY OF THREE-DIMENSIONAL MOLECULAR INFORMATION

Patent Number: JP6251125  
Publication date: 1994-09-09  
Inventor(s): MIURA KAZUNARI; others: 01  
Applicant(s): NEC CORP; others: 01  
Requested Patent: ☐ JP6251125  
Application Number: JP19930056582 19930222  
Priority Number(s):  
IPC Classification: G06F15/62; G06F15/60  
EC Classification:  
Equivalents: JP2573785B2

### Abstract

**PURPOSE:** To easily grasp an operating method and a result of operation at the time of changing the line-of-sight direction and the incident direction of parallel rays with regard to three-dimensional molecular information.

**CONSTITUTION:** A line-of-sight vector initial value setting part 2 and a light beam vector initial value setting part 3 set initial values of a line-of-sight vector and a light beam vector, and a line-of-sight setting celestial sphere display data initial value setting part 4 and a light beam setting celestial sphere display data initial value setting part 5 set initial values of display data of a line-of-sight setting celestial sphere and a light beam setting celestial sphere. A line-of-sight setting celestial sphere display processing part 6 superposes a line-of-sight setting celestial sphere on a molecular skeleton and displays it, and changes interactively a change of the line-of-sight direction, and a light beam setting celestial sphere display processing part 7 superpose a light beam setting celestial sphere on the molecular skeleton and displays it, and changes interactively a change of the incident direction of parallel rays. A geometrical converting information/light beam direction converting information generating part 8 generates rotational information and light beam direction converting information of the line-of-sight setting celestial sphere and the molecular skeleton, based on change information of the line-of-sight vector and the light beam vector.

Data supplied from the esp@cenet database - I2